

Lösen von QUBO-Problemen auf einem Adiabatischen Quanten-Annealer

Elisabeth Lobe

Software für Raumfahrtssysteme und interaktive Visualisierung
Simulations- und Softwaretechnik
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.

19. Mai 2017

Wissen für Morgen



Gliederung

1. Grundlagen des Quantencomputing
2. Übertragung von Problemen



Gliederung

1. Grundlagen des Quantencomputing

- Allgemeine Prinzipien
- Adiabatisches Quanten-Annealing

2. Übertragung von Problemen



Quantenbits (Qubits)

- Zustand eines Qubits ist Superposition von „0“ **und** „1“

$$|\phi\rangle = \alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle \cong \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^2$$

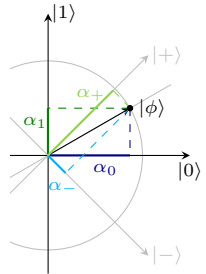
- Messung* verändert den Zustand in

- $|\phi\rangle = |0\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit $|\alpha_0|^2$
- $|\phi\rangle = |1\rangle$ mit Wahrscheinlichkeit $|\alpha_1|^2$
($|\alpha_0|^2 + |\alpha_1|^2 = 1$)

- Ergebnis entspricht klassischer Information

- * beschrieben durch linearen hermiteschen Operator: $|\phi\rangle \rightarrow \mathbf{H} |\phi\rangle$

- Orthonormale Basis entspricht Eigenvektoren der Abbildungsmatrix
- Die messbaren Werte sind deren reellen Eigenwerte
- Realisiert durch Projektion auf Unterraum zu zufälligem Eigenwert



Quantenregister

→ Zusammenfügen durch Kronecker-Tensorprodukt

$$\begin{aligned}
 |\phi\rangle |\psi\rangle &= (\alpha_0 |0\rangle + \alpha_1 |1\rangle) (\beta_0 |0\rangle + \beta_1 |1\rangle) \\
 &= \alpha_0 \beta_0 |00\rangle + \alpha_0 \beta_1 |01\rangle + \alpha_1 \beta_0 |10\rangle + \alpha_1 \beta_1 |11\rangle \\
 &\cong (\alpha_0 \beta_0, \alpha_0 \beta_1, \alpha_1 \beta_0, \alpha_1 \beta_1)^T = \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

→ Zustand eines n -Qubit-Registers

$$\begin{aligned}
 |\Phi\rangle &= \sum_{x \in \{0,1\}^n} \alpha_x |x\rangle = \sum_{k=0}^{2^n-1} \alpha_k |k\rangle \\
 &\cong (\alpha_0, \dots, \alpha_{2^n-1})^T = \alpha \in \mathbb{C}^{2^n}
 \end{aligned}$$

→ 2^n -dimensionaler komplexer Hilbert-Raum mit Skalarprodukt über \mathbb{C}

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \langle \alpha, \beta \rangle = \bar{\alpha}^T \cdot \beta$$



Universeller Quantencomputer

- Anwenden von Quantengattern
- Manipulation durch Multiplizieren unitärer Matrizen $U \in \mathbb{C}^{2^n \times 2^n}$

$$U |\Phi\rangle \cong U\alpha$$
- Quantenparallelismus: Gleichzeitiges Rechnen auf „0“ **und** „1“
- Verschränkung: Wert des 1. an Wert des 2. Qubits gebunden
- Klassische Operationen mit zusätzlichen Qubits realisierbar
- Messen **entweder** $|0\dots 0\rangle |f(0\dots 0)\rangle$ **oder** $|0\dots 1\rangle |f(0\dots 1)\rangle$ **oder** ...

$$\begin{array}{c}
 |0\dots 0\rangle \equiv \text{H}_n \equiv \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle \\
 |0\dots 0\rangle \equiv
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \begin{array}{|c|} \hline x \mapsto x \\ \hline y \mapsto y \oplus f(x) \\ \hline \end{array}
 \end{array}
 \begin{array}{c}
 \equiv \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle |f(x)\rangle
 \end{array}$$



Quantenalgorithmen

Algorithmus	Quanten- gatter	Erfolgs- wkt.	Anwendung	klassisch w.c.
Deutsch-Josza	1^*	1	$f : \{0, 1\}^n \rightarrow \{0, 1\}$ balanciert oder konstant?	$\mathcal{O}(2^n)$
Bernstein-Vazirani	1^*	1	$f_s(x) = x \cdot s \bmod 2$, gesucht $s \in \{0, 1\}^n$	$\mathcal{O}(n)$
Grover	$\mathcal{O}(\sqrt{n})^*$	$1 - \mathcal{O}(\frac{1}{n})$	Suche in unsortierter Daten- bank mit n Einträgen	$\mathcal{O}(n)$
Shor	$\mathcal{O}(n^4)$	$\geq \frac{1}{2}$	Primfaktorzerlegung einer Zahl mit n Bits	$\mathcal{O}(2^{\frac{n}{3}})$

- * Angenommen einzelnes Quantengatter realisiert die Funktion
- ➔ Manipulation bis Erfolgswahrscheinlichkeit maximal
- ➔ Für ideales Quantengattermodell



Stand der Technik

- Rekord für universellen Ansatz:
14 Qubits, 2011, Universität von Innsbruck [1]
- Problematisch:
 - Realisierung der Verschränkung
 - Dekohärenz
 - Relaxation

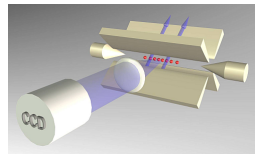
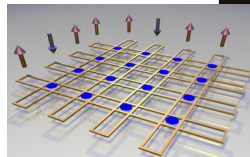
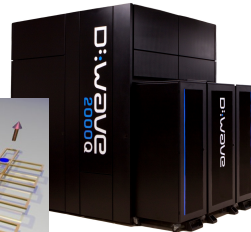


Illustration einer Ionenfalle [2]

-
- Erstes kommerziell erhältliches System der Firma D-Wave Systems
 - Adiabatischer Quanten-Annealer
 - Kunden z.B. Google/NASA
 - 2000 Qubits realisiert über Spinrichtungen in supra-leitenden Spulen



Supraleitende Schleifen [3]



Zeitentwicklung eines Zustandes

- Gegeben durch Schrödingergleichung $\mathbf{H} |\Phi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle$
 - Hamilton-Operator \mathbf{H} beschreibt die Energie des Systems

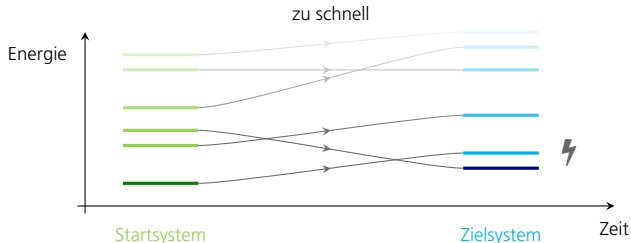
- Vereinfacht sich stationär zu Eigenwertproblem $\mathbf{H} |e_k\rangle = E_k |e_k\rangle$
 - Quantensystem hat diskrete Energieniveaus (H hermitesch)
 - $E_k \in \mathbb{R}$ aufsteigend sortiert, $k = 0, \dots, 2^n - 1$
 - $|e_0\rangle$ Grundzustand mit niedrigster Energie E_0

- Übergang eines Quantensystems in ein anderes in Zeit T
 - Durch Änderung der äußeren Einflüsse
 - Zeitabhängigkeit für $t \in [0, T]$: $\mathbf{H}(t) = \left(1 - \frac{t}{T}\right) \mathbf{H}_{\text{Start}} - \frac{t}{T} \mathbf{H}_{\text{Ziel}}$
 - ➔ Entwicklung beschrieben durch Differentialgleichungssystem



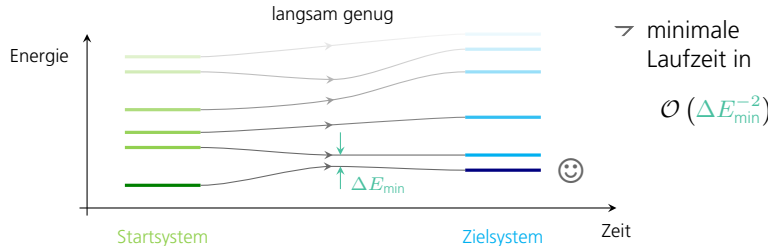
Adiabatisches Theorem der Quantenmechanik

Ein System, das sich anfangs im Grundzustand befunden hat, bleibt bei ausreichend langsamer Entwicklung mit hoher Wahrscheinlichkeit im Grundzustand.



Adiabatisches Theorem der Quantenmechanik

Ein System, das sich anfangs im Grundzustand befunden hat, bleibt bei ausreichend langsamer Entwicklung mit hoher Wahrscheinlichkeit im Grundzustand.



- Keine entarteten Zustände
- Zeitliche Änderung des Hamilton-Operators ist beschränkt



Adiabatische Optimierung

Minimieren von $f : \{0, 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}$ durch

- Kodieren der Lösung im Grundzustand eines Quantensystems

$$\mathbf{H}_f = \sum_{x \in \{0,1\}^n} f(x) |x\rangle \langle x|$$

- Präparieren eines Startsystems mit bekanntem Grundzustand

$$\mathbf{H}_0 = \sum_{\substack{s \in \{+, -\}^n \\ s \neq + \dots +}} 1 |s\rangle \langle s| \quad \text{mit } |+\dots+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x \in \{0,1\}^n} |x\rangle$$

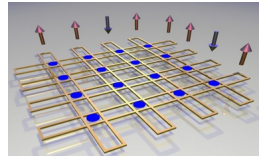
- Messen des Grundzustands nach adiabatischer Entwicklung

Können \mathbf{H}_f , \mathbf{H}_0 durch physikalische Systeme realisiert werden?



Das D-Wave 2000Q™ System

- Nach oben oder unten zeigender Spin
 - Antiparallel zu externem Magnetfeld
 - Im supraleitenden Zustand in Superposition
- Überlappung der Schleifen
 - Regulierbare Beeinflussung durch Kopplungselemente
 - Paarweise Verschränkung



$$H_q = \sum_{j=1}^n g_j X_j + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^n S_{j,k} X_j X_k$$

$$= \sum_{x \in \{0,1\}^n} q(x) |x\rangle \langle x|$$

$$X_j = \mathbb{I}_{2^{j-1}} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \mathbb{I}_{2^{n-j}}$$

$$= \text{diag}(x_j : x \in \{0,1\}^n)$$

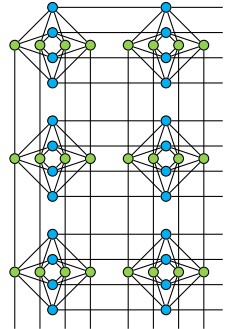
$$\text{mit } q(x) = \sum_{j=1}^n g_j x_j + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^n S_{j,k} x_j x_k$$

⇒ Löst QUBO-Probleme (quadratic unconstrained binary optimization)



Einschränkungen

- Interaktionsgraph: (unvollständiger) Chimera-Graph
- Aktuelle Zahl an Qubits: ca. 2000
- Höhe der Parameter $g_j, S_{j,k} \in [-10, 10]$
- Präzision der Parameter ca. $\frac{1}{30}$
- Laufzeit und Erfolgswahrscheinlichkeit?
 - A-Priori-Abschätzung in Abhängigkeit von $n, g_j, S_{j,k}$?
 - Große Zahl an Wiederholungen bei fester Laufzeit und anschließende statistische Auswertung
- Keine vollständige Abschirmung äußerer Einflüsse



Gliederung

1. Grundlagen des Quantencomputing

2. Übertragung von Problemen

- Reduktionen auf QUBOs
- Einbettung in Chimera-Graph
- Gewichtsverteilung



QUBOs

Mit Abbildungsmatrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\begin{aligned} q(x) &= x^\top Q x = \sum_{j=1}^n Q_{j,j} x_j + \sum_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^n (Q_{j,k} + Q_{k,j}) x_j x_k & x \in \{0,1\}^n \\ &= \sum_{v \in V} g_v x_v + \sum_{\{v,u\} \in E} S_{\{v,u\}} x_v x_u & x \in \{0,1\}^V \end{aligned}$$

$$\text{mit } \left. \begin{aligned} V &= \{1, \dots, n\}, \\ E &= \{\{j, k\} : Q_{j,k} + Q_{k,j} \neq 0, j < k\}, \\ g_v &= Q_{v,v} \quad \forall v \in V, \\ S_{\{v,u\}} &= Q_{v,u} + Q_{u,v} \quad \forall \{v, u\} \in E \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Interaktionsgraph} \\ G = (V, E) \end{array}$$

➤ Entscheidungsproblem ist NP-vollständig

➤ Trivial für $Q \in \mathbb{R}_{\geq 0}$ oder Q positiv semidefinit: $\min q(x) = q(\mathbb{0}) = 0$



Reduktionen

- einer ganzzahligen Variablen $z \in \{\tilde{z}, \dots, \hat{z}\}$ über Binärdarstellung

$$z = \sum_{j=0}^{Z-1} 2^j x_j + (\hat{z} - \tilde{z} - 2^Z + 1)x_Z + \tilde{z}$$

mit $Z = \lfloor \log_2(\hat{z} - \tilde{z}) \rfloor$ und $x_j \in \{0, 1\} \forall j = 0, 1, \dots, Z$

- des Grades einer beliebigen pseudobooleschen Funktion durch

- Ersetzen des Produkts $x_j x_k$ mit zusätzlicher Variable $z \in \{0, 1\}$
- Hinzufügen der Bedingung $x_j x_k = z$

- ➔ Zusätzliche Variablen nötig ➔ Minimale Anzahl ?

- Einer Nebenbedingung durch Addition des Strafterms $p : \{0, 1\}^n \rightarrow \mathbb{R}_{\geq 0}$ an die Zielfunktion mit

$$P \cdot p(x) \begin{cases} > 0, & x \text{ verletzt Nebenbedingung,} \\ = 0, & \text{sonst.} \end{cases}$$



Strafterme für Nebenbedingungen

Beispielsweise

➤ Reduktionsbedingung $x_j x_k = z$ für $x_j, x_k, z \in \{0, 1\}$

$$p(x_j, x_k, z) = x_j x_k + 3z - 2z(x_j + x_k)$$

➤ Lineare Nebenbedingung

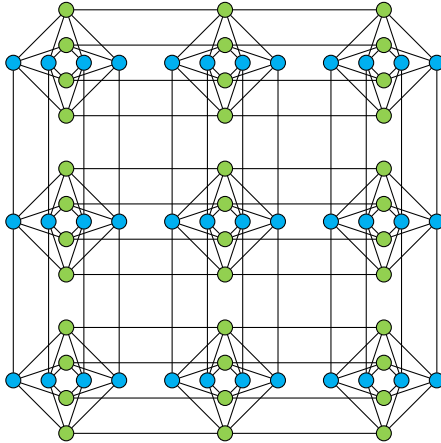
$$\sum_{j \in I} a_j x_j \leq b \Leftrightarrow \sum_{j \in I} a_j x_j = z \in \{0, \dots, b\}$$

$$\Leftrightarrow \sum_{j \in I} a_j x_j - z = 0 \Leftrightarrow \left(\sum_{j \in I} a_j x_j - z \right)^2 = 0$$

- ➔ Einschränkung auf ganzzahlige Parameter
- ➔ $P >$ maximaler Beitrag der Zielfunktion bei Verletzung der Bedingung
- ➔ Skalierung des QUBOs genügt Präzisionseinschränkungen?



Chimera-Graph

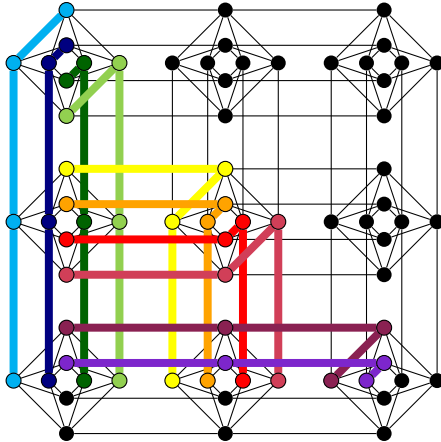


$C_{n,m}$

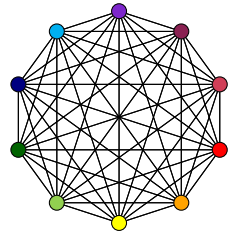
- n Zeilen, m Spalten
- bipartit
- Hamilton-Kreis für $n, m > 1$



Chimera-Minor: Vollständiger Graph



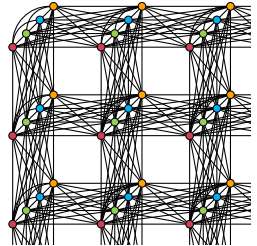
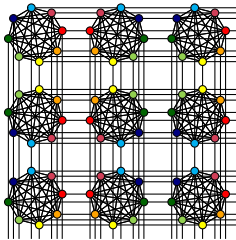
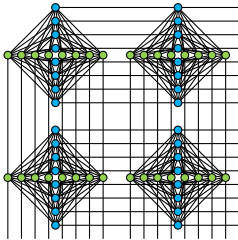
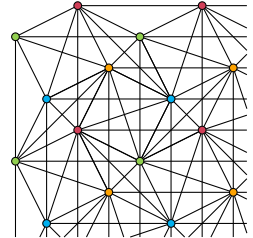
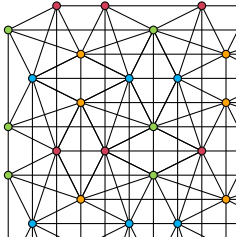
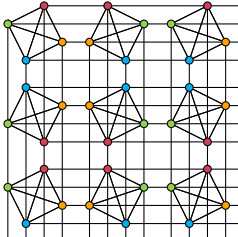
Überwinden fehlender
Kopplungen durch
Zusammenfassen zu
logischen Knoten



Benötigt $\Theta(n^2)$ Qubits



Chimera-Minoren



Einbettung

Die Funktion $M : V \rightarrow 2^{V(C_{n,m})}$ definiert eine Einbettung eines Graphen $G = (V, E)$ in den Chimera-Graphen $C_{n,m}$, wenn

- $M(v)$ einen zusammenhängenden Graphen für alle $v \in V$ induziert
- $M(v) \cap M(w) = \emptyset$ für alle $v, w \in V$ mit $v \neq w$
- für alle $\{v, w\} \in E$ existieren $c \in M(v), d \in M(w)$, so dass $\{c, d\} \in E(C_{n,m})$

➔ Allgemeines Einbettungsproblem NP-schwer, unklar für $C_{n,m}$

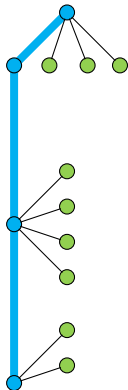
Neues QUBO

$$\bar{q}(y) = \sum_{v \in V} \left(\sum_{c \in M(v)} \bar{g}_c y_c + \sum_{\{c,d\} \in E(M(v))} \bar{S}_{\{c,d\}} y_c y_d \right) + \sum_{\substack{e \in E \\ \{c,d\} = M(e)}} S_{\{v,w\}} y_c y_d$$

mit $\bar{q}(y) = q(x) \Leftrightarrow x_v = y_c \ \forall c \in M(v)$ und $g_v = \sum_{c \in M(v)} \bar{g}_c + \sum_{\{c,d\} \in E(M(v))} \bar{S}_{\{c,d\}}$



Gewichtsverteilung



$$\bar{q}_v(y, z) = \sum_{c \in M(v)} \bar{g}_c y_c + \sum_{\{c, d\} \in E(M(v))} \bar{S}_{\{c, d\}} y_c y_d + \sum_{\substack{\{v, w\} \in E \\ \{c, d\} = M(\{v, w\})}} S_{\{v, w\}} y_c z_d$$

➤ Für Synchronisation muss gelten für alle $z \in \{0, 1\}^*$

$$\operatorname{argmin}_{y \in \{0, 1\}^{M(v)}} \bar{q}(y, z) \subseteq \{0, 1\}$$

➤ Dann ist

$$\min_{y \in \{0, 1\}^{M(v)}} \bar{q}(y, z) = \begin{cases} \bar{q}(0, z), & \text{wenn } \bar{q}(1, z) > 0, \\ \bar{q}(1, z), & \text{sonst} \end{cases}$$

$$\text{mit } \bar{q}(0, z) = 0 \text{ und } \bar{q}(1, z) = \sum_{\substack{\{v, w\} \in E \\ \{c, d\} = M(\{v, w\})}} S_{\{v, w\}} z_d + g_v$$

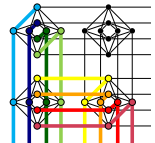
➤ Ausreichende Bedingungen

$$\bar{g}_c + \bar{S}_{\{c, d\}} < -\sigma_c^+ \quad \forall \{c, d\} \in E(M(v)) \quad \forall c \in M(v)$$



Nächste Forschungsschwerpunkte

- Bestmögliche Einbettung in Rechnerstruktur
- Partitionierung großer Instanzen
- Kombination klassischer und Quantencomputer
- Algorithmenentwurf
- Komplexitätstheorie, Überlegenheitsnachweis
- Simulation des Ablaufs, Vergleich mit Experiment
- Benchmarking
- Neuartige Rechnerstrukturen mit höherem Kopplungsgrad
- ➔ Luft- und Raumfahrtanwendungen



Algorithm 1 QUBO-Preprocessing

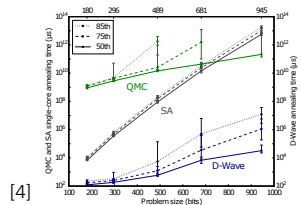
Input: Graph $G = (V, E)$, $w \in \mathbb{R}^V$, $S \in \mathbb{R}^E$

Output: $x \in \{-1, 0, 1\}^V$

```

1: procedure PREPROCESS( $V, E, w, S$ )
2:    $sthChanged \leftarrow \text{True}$ 
3:    $x \leftarrow -1^V$ 
4:   while  $sthChanged$  do
5:      $sthChanged \leftarrow \text{False}$ 
6:     for  $v \in V$  do
7:        $\sigma^+ \leftarrow \frac{1}{2} \sum_{e \in \delta(v)} (S_e + |S_e|)$ 

```



Referenzen

Dr. Tobias Stollenwerk SC-HPC – tobias.stollenwerk@dlr.de

- *Experiences with Scheduling Problems on Adiabatic Quantum Computers*, T. Stollenwerk, A. Basermann, 2016
 - *Quadratische binäre Optimierung ohne Nebenbedingungen auf Chimera-Graphen*, E. Lobe, 2016
 - *Quantum Computation by Adiabatic Evolution*, E. Farhi u.a., 2000
 - *How Powerful is Adiabatic Quantum Computation?*, W. van Dam u.a., 2002
- [1] www.uibk.ac.at/ipoint/news/2011/mit-14-quantenbits-rechnen.html.de
 - [2] www.weltderphysik.de/gebiet/technik/quanten-technik/quantencomputer
 - [3] www.dwavesys.com/
 - [4] <https://arstechnica.co.uk/information-technology/2015/12/google-nasa-our-quantum-computer-is-100-million-times-faster-than-normal-pc/>



Fragen?

Elisabeth Lobe

Software für Raumfahrtssysteme und interaktive Visualisierung
Simulations- und Softwaretechnik
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
elisabeth.lobe@dlr.de

Wissen für Morgen

